

日 本 国 特 許 庁  
JAPAN PATENT OFFICE

11.12.03

Best Available Copy

別紙添付の書類に記載されている事項は下記の出願書類に記載されている事項と同一であることを証明する。

This is to certify that the annexed is a true copy of the following application as filed with this Office.

出 願 年 月 日      2 0 0 2 年 1 2 月 1 2 日  
Date of Application:

出 願 番 号      特 願 2 0 0 2 - 3 6 0 3 6 9  
Application Number:  
[ST. 10/C]:      [ J P 2 0 0 2 - 3 6 0 3 6 9 ]

出 願 人      株式会社産学連携機構九州  
Applicant(s):

RECEIVED	
06 FEB 2004	
WIPO	PCT

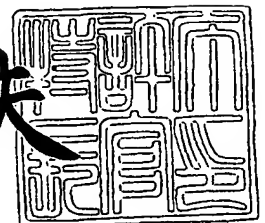
This Page Blank (uspto)

**PRIORITY  
DOCUMENT**  
SUBMITTED OR TRANSMITTED IN  
COMPLIANCE WITH RULE 17.1(a) OR (b)

2 0 0 4 年    1 月 2 2 日

特許庁長官  
Commissioner,  
Japan Patent Office

今 井 康 夫



【書類名】 特許願

【整理番号】 P0537T

【あて先】 特許庁長官殿

【国際特許分類】 C07C 15/20  
H05B 33/00  
C09K 11/06

【発明者】

【住所又は居所】 福岡県福岡市早良区昭代 2 - 1 4 - 1 1 - 1 6

【氏名】 竹内 正之

【発明者】

【住所又は居所】 福岡県福岡市東区箱崎 6 - 4 - 2 3

【氏名】 池田 将

【発明者】

【住所又は居所】 福岡県福岡市東区三苫 2 - 1 3 - 1 7

【氏名】 新海 征治

【特許出願人】

【識別番号】 800000035

【氏名又は名称】 株式会社産学連携機構九州

【代理人】

【識別番号】 100087675

【弁理士】

【氏名又は名称】 筒井 知

【手数料の表示】

【予納台帳番号】 067483

【納付金額】 21,000円

【提出物件の目録】

【物件名】 明細書 1

【物件名】 図面 1

【物件名】 要約書 1

【プルーフの要否】 要

【書類名】 明細書

【発明の名称】 芳香族系化合物

【特許請求の範囲】

【請求項 1】 下記の一般式 (I) で表わされることを特徴とする芳香族系化合物。

【化 1】



[式 (I) 中、A は縮合型芳香族炭化水素の残基を表わし、X は水素結合性部位を表わし、Y は炭素数 3 ～ 18 の鎖式官能基を表わし、n は 2 ～ 10 の整数を表わす。]

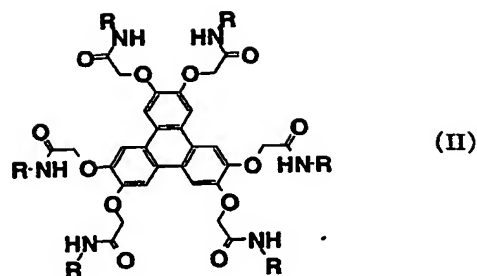
【請求項 2】 前記縮合型芳香族炭化水素が、トリフェニレン、アセン類、フェナントレン、ペリレン、フルオレン、ピレン、コロネン、またはヘキサベンゾコロネンであり、前記水素結合性部位が、アミド結合、尿素結合、チオ尿素結合、またはウレタン結合を含む原子団であり、前記鎖式官能基が、アルキル基、フルオロアルキル基、またはポリエチレングリコール基であることを特徴とする請求項 1 に記載の芳香族系化合物。

【請求項 3】 前記鎖式官能基の炭素数が 10 ～ 18 であることを特徴とする請求項 1 または 2 に記載の芳香族系化合物。

【請求項 4】 前記縮合型芳香族炭化水素がトリフェニレンであることを特徴とする請求項 1 ～ 3 のいずれかに記載の芳香族系化合物。

【請求項 5】 前記式 (I) が下記の式 (II) で表わされることを特徴とする請求項 4 に記載の芳香族系化合物。

## 【化2】



〔式 (II) 中、Rは炭素数3～18のアルキル基を表わす。〕

【請求項6】 前記Rが炭素数10～18のアルキル基であることを特徴とする請求項5に記載の芳香族系化合物。

## 【発明の詳細な説明】

## 【0001】

## 【発明の属する技術分野】

本発明は、有機分子を機能化する技術分野に属し、特に、電荷輸送材料などとして各種の用途が期待される新規な芳香族系化合物に関する。

## 【0002】

## 【従来の技術】

$\pi$  電子過剰 ( $\pi$  電子リッチ) な有機分子は、電荷輸送材料 (あるいは光導電性材料) として、有機EL素子、有機発光ダイオード、光電変換素子、電子写真感光体、液晶ディスプレイなどの分野で多用されている。用いられる有機分子は、一般に、長い $\pi$ 共役系を有したり、平面状 (ディスク状) の $\pi$ 電子系分子が積み重なることによって、電荷 (正孔: ホール) の輸送が効果的に行なわれるような分子構造を有するものであり、後者の例がトリフェニレンに代表されるディスク状の縮合型芳香族炭化水素である。

## 【0003】

このトリフェニレンは長鎖を導入することで液晶性を示し、有機分子としては高い導電性を有する材料として知られている。これは、ディスク状の分子が積み重なる、すなわち、カラム状に配向することにより、所謂ディスコティックな液晶構造を呈するためと解されている。しかし、実際にトリフェニレンは液晶状態

では4個のすべての環が完全に重なり合った配向をとっていないことが計算などから明らかにされている（例えば、文献P. Etchegoin, Phys. Rev. E, 56, 538 (1997)参照）。

#### 【0004】

トリフェニレンのようなディスク状芳香族化合物の分子配向を制御してその $\pi$ 電子系（芳香環）が完全に重なり合うように分子集合させることができれば、既述のような種々の分野において電荷輸送特性や光導電特性などの向上した機能素子の開発に資するものと期待されるが、そのような技術は見当らない。

#### 【0005】

##### 【発明が解決しようとする課題】

本発明の目的は、電荷輸送材料や光導電材料などとして好適な新規な芳香族系化合物を提供することにある。

#### 【0006】

##### 【課題を解決するための手段】

本発明者は、検討を重ねた結果、トリフェニレンのような縮合型芳香族炭化水素を基本骨格とする分子設計に基づき、芳香環が可及的に重なり合う（すべての芳香環が重なり合うこともできる）ように配向して分子集合体を形成する新しいタイプの $\pi$ 電子系有機分子を見出し本発明を導き出したものである。

#### 【0007】

かくして、本発明に従えば、下記の一般式（I）で表わされる芳香族系化合物が提供される。

#### 【0008】

##### 【化3】



#### 【0009】

式（I）中、Aは縮合型芳香族炭化水素の残基を表わし、Xは水素結合性部位を表わし、Yは炭素数3～18の鎖式官能基を表わし、nは2～10の整数を表わす。

## 【0010】

## 【発明の実施の形態】

既述の式 (I) で表わされる本発明の化合物の基本骨格を構成する縮合型芳香族炭化水素 (A) としては、実質的にディスク状 (円盤状) の分子構造を有する既知の各種の化合物が適用できる。縮合型芳香族炭化水素の好ましい例は、トリフェニレン、アセン類 (アントラセン、ナфтаセン、ペンタセン、ヘキサセン、ヘプタセン)、フェナントレン、ペリレン、フルオレン、ピレン、コロネン、またはヘキサベンゾコロネンであり、図 1 にそれらの化学構造が示されている。(なお、本願明細書および図面に示す化学構造式においては、慣用的な表現法に従い、炭素原子や水素原子を省略していることもある。)

## 【0011】

式 (I) で示されるように本発明の芳香族化合物は、以上のような縮合型芳香族炭化水素の残基に、水素結合部位 (X) と鎖式官能基 (Y) から成る鎖状部が複数 ( $n = 2 \sim 10$ ) 結合されており、この点、トリフェニレンに単に長鎖のみが導入された従来より既知の  $\pi$  電子系ディスク状分子 (化合物) とは異なる特徴を有するものである。

## 【0012】

水素結合部位の好ましい例としては、アミド結合、尿素結合、チオ尿素結合またはウレタン結合を含む原子団が挙げられるが、これらに限られるものではない。また、鎖式官能基としては、アルキル基が一般的であるが、フルオロアルキル基やポリエチレングリコール基なども使用可能である。鎖式官能基は、炭素数が 3 から 18 であるような長さを有し、後述するように、この長さがディスク状分子の配向性に影響を与える。図 2 に、水素結合部位および鎖式官能基として好ましい例の化学構造式が示されている。

## 【0013】

如上の本発明の芳香族化合物は、特定の有機溶媒 (一般に炭化水素系の非極性溶媒) をゲル化し、その有機溶媒中で分子集合体 (分子会合体) を形成する。そして、この分子集合体 (ゲル) の構造は、有機溶媒を蒸発除去した固体状態や、該有機溶媒からキャストフィルム化した状態でも保持される。

## 【0014】

式(I)で表わされる本発明の芳香族系化合物が形成する分子集合体は、芳香環、すなわち $\pi$ 電子系が重なり合った分子配向をとることが、分光学的測定やX線回折測定などにより確認されている。特に、鎖式官能基が長い(炭素数10～18)場合には、形成される分子集合体において、すべての芳香環が重なり合った配向(eclipsed overlap)を呈することもできる。

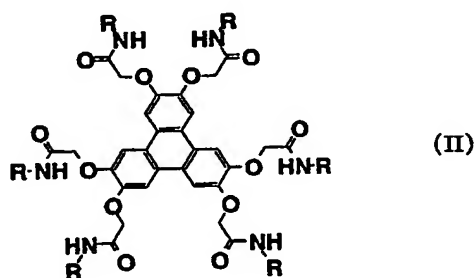
これは、本発明の芳香族系化合物においては、芳香環同志の会合力のみならず、水素結合の存在によって各分子間の配向(重なり合い)が強められ、特に、その鎖式官能基が長くなると、そのゆらぎの効果も加わることによってeclipsed overlapが安定に形成されるものと考えられる(後述の実施例4参照)。

## 【0015】

本発明の芳香族系化合物として好ましい例は、縮合型芳香族炭化水素がトリフェニレンであり、特に好ましいのは、式(I)が下記の式(II)で表わされるものである。

## 【0016】

## 【化4】



## 【0017】

式(II)中、Rは炭素数3～18のアルキル基を表わすが、Rが炭素数10～18のアルキル基(例えば、ドデシル基)である場合には、4個のすべての環が重なり合った配向(eclipsed overlap)をとることが示されている。

## 【0018】

本発明の芳香族系化合物は、既知の反応を工夫することによって合成することができる。図3には、例として、縮合型芳香族炭化水素がトリフェニレンである



上記の式 (II) で表わされる化合物の大略の合成スキームが示されている。

それらの芳香族系化合物のそれぞれに応じて適当な有機溶媒を用い、その有機溶媒と芳香族系化合物からゲルを形成させた後、有機溶媒を蒸発除去し乾燥することにより、当該芳香族系化合物から成る分子集合体を粉末状固体として得ることができる。

### 【0019】

#### 【実施例】

以下に本発明の特徴をさらに具体的に示すために実施例を記すが、本発明はこれらの実施例によって制限されるものではない。

#### 実施例 1: 芳香族系化合物の合成

本発明に従う芳香族系化合物として、図 3 に概示する反応スキーム [(i) および (ii)] に従い、既述の式 (II) において  $R = C_{12}H_{25}$  に相当する化合物 1 および  $R = C_4H_9$  に相当する化合物 2 を合成した。比較のために、従来から知られているトリフェニレンに単に長鎖 ( $OC_{12}H_{25}$ ) のみが導入された化合物 3 [スキーム (iii)] も合成した。

### 【0020】

#### 1-ブロモ酢酸ドデシルアミドの合成:

窒素気流下、滴下ロートを取りつけた 200ml 二口フラスコにドデシルアミン 5g (26.97mmol)、TEA 3.77ml (1.1eq.) および乾燥塩化メチレン 100ml を加えた。氷浴下、プロモ酢酸クロライド 2.23ml (1.0eq.) の乾燥塩化メチレン溶液 50ml を滴下した。滴下終了後、室温で一晩攪拌した後不要物を取り除き、蒸留水 (200ml  $\times$  2) で洗浄した。さらにフラッシュカラムクロマトグラフィー (シリカゲル: クロロホルム) で原点成分を取り除いた。これ以上精製を行わず次の反応に用いた。

### 【0021】

#### 化合物 1 の合成:

窒素気流下、100ml の二口フラスコに 2, 3, 6, 7, 10, 11-ヒドロキシターフェニレン 300mg (0.92mmol) を乾燥 DMF 25ml に溶解した。すりつぶした炭酸カリウム 1.28g (6.0eq.) および 1-ブロモ酢酸ドデシルアミド 1.86g (6.6eq.) を加え

、60℃で一晩攪拌した。200mlの蒸留水を加え、沈殿物を濾取し、メタノールで洗浄した。クロロホルムを加え溶解した後、カラムクロマトグラフィー（シリカゲル；クロロホルム：メタノール＝10：1）で精製し、白色の粉末を得た（800mg/52%）。同定はMALDI-TOF-MS、元素分析および $^1\text{H-NMR}$ （表1）により行なった。

MALDI-TOF-MS (CHCA) :  $m/z$  1700.05 ( $[\text{M}+\text{Na}]^+$ の理論値11715.605)。

元素分析： $\text{C}_{102}\text{H}_{174}\text{N}_6\text{O}_{12}$ の計算値：C、73.07；H、10.46；N、5.01%。

実測値：C、72.17；H、10.21；N、4.80%。

### 【0022】

【表1】

$^1\text{H-NMR}$ (RT, $\text{CDCl}_3$ , 600MHz, TMS standard)				
$\delta$	分裂(J/Hz)	積分比	理論比	帰属
0.87	t	17.8	18H	a( $\text{CH}_3$ )
1.11-1.29	m	120.5	108H	b( $\text{CH}_2\text{CH}_2$ )
1.54-1.58	m	-	12H	c( $\text{NHCH}_2\text{CH}_2$ )
3.38	q	18.0	12H	d( $\text{NHCH}_2$ )
4.75	s	14.8	12H	e
6.84	s	5.4	6H	f
7.79	s	6.0	6H	g

### 【0023】

化合物2の合成：

ドデシルアミンの代わりにブチルアミンを用いて、化合物1と同様の操作で合成を行ない、生成物を同定した。

### 【0024】

化合物3の合成：

窒素気流下、100mlの二口フラスコに2, 3, 6, 7, 10, 11-ヒドロキシターフェニレン50mg (0.15mmol) を乾燥DMF5mlに溶解した。すりつぶした炭酸カリウム0.13g (6.0eq.) および1-ドデシルブロミド246.7mg (6.6eq.) を加え、60℃で一晩攪拌した。200mlの蒸留水を加え、沈殿物を濾取し、メタノールで洗浄した。クロロホルムを加え溶解した後、カラムクロマトグラフィー（シリカゲル；

ヘキサン：クロロホルム＝2：1）で精製し、白色の粉末を得た（70mg、35%）。同定はMALDI-TOF-MS、元素分析および $^1\text{H}$ -NMR（表2）により行なった。MALDI-TOF-MS（CHCA）： $m/z$  1334.82（ $[\text{M}+\text{H}]^+$ の理論値1334.50）。元素分析： $\text{C}_{102}\text{H}_{174}\text{N}_6\text{O}_{12} \cdot 0.75\text{CHCl}_3$ の計算値：C、76.56；H、11.10%。実測値：C、76.45；H、11.52%。

【0025】

【表2】

$^1\text{H}$ -NMR (RT, $\text{CDCl}_3$ , 250MHz, TMS standard)				
$\delta$	分裂(J/Hz)	積分比	理論比	帰属
0.86	t	20.0	18H	a( $\text{CH}_3$ )
1.20-1.55	m	196.3	108H	b( $\text{CH}_2$ )
1.97	m	18.2	12H	c( $\text{OCH}_2\text{CH}_2$ )
4.23	m	13.9	12H	d( $\text{OCH}_2$ )
7.83	s	6.0	6H	e

【0026】

#### 実施例2：ゲル形成とその吸収スペクトル

この実施例は、実施例1で合成したような本発明の芳香族系化合物が特定の有機溶媒中で $\pi-\pi$ 相互作用による分子集合体（有機ゲル）を形成することを示すものである。

#### ゲル化試験

マイクロチューブ（内径5mm）に化合物1，2の濃度が10mMとなるように各溶媒を100 $\mu\text{l}$ を加え、超音波照射およびドライヤーにて加熱溶解した。室温で30分間放置後、試料を逆さに傾けても試料が流れなかったものを目視によりゲルと判定した。ゲル化しなかったものについてはさらに温度を冷やし静置した後判定した。

。

表3に化合物1，2のゲル化能を示す。表1に示されるように、化合物1は特に炭化水素系の非極性溶媒とゲルを形成することができる。化合物3は高い溶解性を示し、ゲル化挙動は観測されなかった。

【0027】

【表 3】

溶媒	1	2
エタノール	I	I
ヘキサノール	P	I
酢酸エチル	I	I
ヘキサン	G	I
オクタン	G	I
シクロヘキサン	G	p G
p-キシレン	G	P
ベンゼン	S	P
トルエン	S	P
クロロホルム	S	S
四塩化炭素	S	S
テトラヒドロフラン	S	P
ジフェニルエーテル	S	S

I = 不溶 (insoluble) S = 可溶 (soluble)  
P = 沈殿 (precipitate) G = ゲル化 (gel)  
p G = 部分的にゲル化 (partial gel)

## 【0028】

## 吸収スペクトル測定

化合物 1 および 2 のシクロヘキサングル、ならびにそれらの化合物がゲル化能を有さず溶解しているクロロホルム溶液について吸収スペクトルを測定した。ゲルについては、所定濃度のゲルを調整した後、石英板に滴下し、もう一枚の石英板で挟んだものを試料とした。また、クロロホルム溶液 ( $2.0 \times 10^{-5} \text{M}$ ) は LB プロットにより単分散していることを確認した。

図 4 に、得られた吸収スペクトルを示す。化合物 1 および 2 はシクロヘキサン中で、トリフェニレン部位が基底状態で相互作用できるほど近接していることが示唆される。また、スペクトルの形状は多少異なるものの、変化の傾向は類似している。したがって、会合形態はほぼ類似したものであると推測される。すなわち、トリフェニレン部位はスタッキングしている（重なり合うように配向している）ことが示唆される。一重項励起状態 ( $S_0 \rightarrow S_1$ ) への遷移エネルギーに相当する 340nm 付近の吸収は、いずれも長波長側にシフトしている。

吸収スペクトルの温度変化を測定したところ、ゲルがゾルに転移する昇温に伴

いスペクトルのブロードニングの解消が確認され、ゲル状態における  $\pi-\pi$  相互作用の存在が示された。

### 【0029】

#### 実施例 3: XRD 等による構造評価

この実施例は、実施例 2 で形成された化合物 1 によるゲル等について、XRD (X線回折) や IR (赤外線吸収スペクトル) による構造評価を行なった結果を示すものである。

#### XRD 測定

化合物 1 のシクロヘキサゲルから、室温でエバポレータにより溶媒を取り除いた固体について XRD 測定を行なった。粉末は 0.7mm 径のキャピラリーに詰めた。化合物 2 はシクロヘキサンのパーシャルゲル状態から、室温でエバポレータにより溶媒を取り除き、得られた粉末を 0.7mm 径のキャピラリーに詰めた。

化合物 1 によるシクロヘキサゲル由来の粉末の XRD 測定結果を図 5 に示す。広角側の  $2\theta = 20 \sim 30^\circ$  の領域の二つのピーク、 $d = 4.35 \text{ \AA}$ 、 $d = 3.56 \text{ \AA}$  が認められる。これらは、それぞれ長鎖ドデシル基の融解と、トリフェニレン分子間距離 (interdisc-distance) のゆらぎに相当している。その値はトリフェニレンを基体とした液晶とほぼ同等の値である。また、二次元性を示す低角側にも二つのピークが確認される。これらのことから、本発明の化合物 1 は、トリフェニレンを基体とする液晶と同様に、各分子がカラム状に重なり合った分子集合体を形成するものと理解される。但し、ディスコティック液晶の二次元規則性を判断する  $2\theta = 5^\circ$  付近のピークが確認されないことから規則的な二次元のパッキング (hexagonal など) ではないと考えられる。

化合物 2 とシクロヘキサンから形成されるゲル由来の粉末の XRD 測定についても、化合物 1 の場合と類似した結果が得られた。すなわち、トリフェニレン分子間距離のゆらぎに相当するピーク ( $d = 3.58 \text{ \AA}$ ) が認められ、この値は図 5 の化合物 1 のピークとほぼ同じ値であった。但し、化合物 2 は短いアルキル鎖しか有していないためアルキル鎖のゆらぎによるハローは観測されなかった。

### 【0030】

#### IR 測定

化合物 1 および 2 をそれぞれ 5mM となるように、クロロホルムまたはシクロヘキサンを加えたサンプルを調整し、このサンプルから基板（石英版）にキャストし、風乾した後、IR 測定を行った。

この結果、アミド I 吸収帯（C=O 伸縮）は水素結合により  $1655\text{cm}^{-1}$  に観測された。アミド II 吸収帯（NH 変角）は、 $1622\text{cm}^{-1}$  付近に肩となって現われている。また、NH 伸縮も  $3275\text{cm}^{-1}$  および  $3095\text{cm}^{-1}$  付近に観測された。以上から、化合物およびキャストした溶媒に関わらず、水素結合が形成されていることが示された。

### 【0031】

#### 実施例 4：蛍光スペクトル測定による構造評価

この実施例は、実施例 2 で得られるような本発明の芳香族化合物由来のゲルについて更に詳細な構造評価を行なった例であり、特に、化合物 1 由来のゲル（分子集合体）においては、4 個のすべての芳香環が重なり合った配向（eclipsed overlap）を呈することを示すものである。

### 【0032】

化合物 1, 2, 3 の溶液中とゲル中での蛍光スペクトル測定：

化合物 1 または化合物 2 とシクロヘキサンからゲルを形成させた（以下、単にシクロヘキサングルという）。シクロヘキサン中の化合物 1 または化合物 2 の濃度は 5mM とした。また、化合物 1, 2 または 3 の  $5 \times 10^{-5}\text{M}$  クロロホルム溶液を調製した。それぞれについて蛍光スペクトルを測定した。励起波長  $\lambda_{\text{ex}}$  は 340nm である。

化合物 1 についての結果を図 6 に示す。図に示すように、化合物 1 のクロロホルム溶液中での蛍光は、これまでに報告されている長鎖をエーテル結合で修飾したトリフェニレンと同様のスペクトルであった。しかし、シクロヘキサングル中では長波長シフトした蛍光とともに 525nm を中心にブロードな蛍光を示した。このスペクトルの形状は励起波長を 340nm を中心に変化させてもほとんど変わらなかった。シクロヘキサングル中の励起スペクトルを測定したところ、一重項励起状態（ $S_0 \rightarrow S_1$ ）への遷移エネルギーに相当する波長（340nm 付近）に吸収が確認された。この事実、および、これまでに報告された（J.B. Birks, Rep. Prog. Phys. 38, 903 (1975))  $-170^\circ\text{C}$  に冷却されたトリフェニレンフィルムのエキサイ

マー発光における波長520nmを考慮すると、525nmの蛍光はエキサイマー発光に帰属できる。また、蛍光の長波長シフトは基底状態エネルギー準位への集合状態の影響に由来するものと考えられる。

同様の測定を化合物2に関して行なった。シクロヘキサゲルの蛍光スペクトルにおいて化合物2では、化合物1のような525nm付近のブロードな蛍光は確認されず、長波長シフトした蛍光のみが観測された。このスペクトルの形状は励起波長を340nmを中心に变化させてもほとんど変わらなかった(図7参照)。

化合物3はシクロヘキサンおよびクロロホルムに溶解し、図8のようなスペクトルを示した。525nm付近の蛍光は認められず、長波長シフトした蛍光も見られなかった。

### 【0033】

固体状態での蛍光スペクトル測定:

化合物1および2はともに熱シクロヘキサンに溶解するので、シクロヘキサンにそれぞれ溶解し、室温でエバポレータにより溶媒を取り除くことによって固体状態にし、蛍光スペクトル測定を行なった。その結果、図6および図7に示されるようなゲル状態での違いを反映したスペクトルの違いが固体状態でも確認された。したがって、ゲル状態での集合形態を保持した固体が形成されていることが確認された。

### 【0034】

以上のように、化合物1のゲル状態に由来する集合形態のみが強いエキサイマー発光を示す。エキサイマーとは、励起状態にある化学種が基底状態にある同じ化学種と形成する励起二量体であり、このエキサイマーが形成されると、一般に励起単量体からの発光とともにエキサイマーからの発光がその長波長側に観測される。化合物1由来のゲルは、この系に該当することが上述の結果から裏づけられる。

エキサイマーの形成にはPz軌道の重なりが重要であり、例えば、フェナントレンのシクロファンにおいて芳香環が完全に重なり合ったときのみエキサイマー発光が観測されることが知られている。本発明の化合物1がシクロヘキサンのような溶媒中で形成した分子集合体(ゲル)は、基底状態において、エキサイマー発

光に有利な芳香環が完全に重なり合った配向 (eclipsed overlap) をとり、励起後速やかにエキサイマーを形成するものと理解される。

#### 【0035】

そして、このような配向制御が行なわれる一因は、化合物 1 のような本発明化合物においては、アミド基 (アミド結合) のような水素結合性部位が導入されていることによるものと考えられる。すなわち、本発明の芳香族系化合物においては、芳香環同志の会合力のみならず、水素結合の存在によって各分子間の配向 (重なり合い) が強められる。さらに、アルキル基のような鎖式官能基も影響している。すなわち、化合物 2 のようにアルキル鎖長の短い場合には従来から知られた液晶性トリフェニレンと同様の配向、すなわち、芳香環が完全ではなく幾分ずれて重なり合った配向 (staggered overlap) をした集合体を形成しているが、化合物 1 のようにアルキル鎖が長くなり、ゆらぎの効果が加わることによって eclipsed overlap が安定になるものと考えられる。

#### 【0036】

##### 【発明の効果】

以上の説明から理解されるように、本発明は、トリフェニレンのような  $\pi$  電子系ディスク状分子の配向を制御する簡便な手法を提案し、これによって、機能性材料として有用な新規な芳香族系化合物を提供するものである。

##### 【図面の簡単な説明】

##### 【図 1】

本発明の化合物を構成する縮合型芳香族炭化水素を例示する。

##### 【図 2】

本発明の化合物を構成する水素縮合性部位および鎖式官能基を例示する。

##### 【図 3】

本発明の芳香族系化合物の 1 例を合成するための反応スキームを概示する。

##### 【図 4】

本発明の芳香族系化合物由来の有機ゲルおよび有機溶媒溶液について測定された吸収スペクトルを例示する。

##### 【図 5】



本発明の芳香族系化合物由来の 1 例について測定された粉末 X 線回折の結果を示す。

【図 6】

本発明の芳香族系化合物由来の 1 例について測定された蛍光スペクトルを示す。

【図 7】

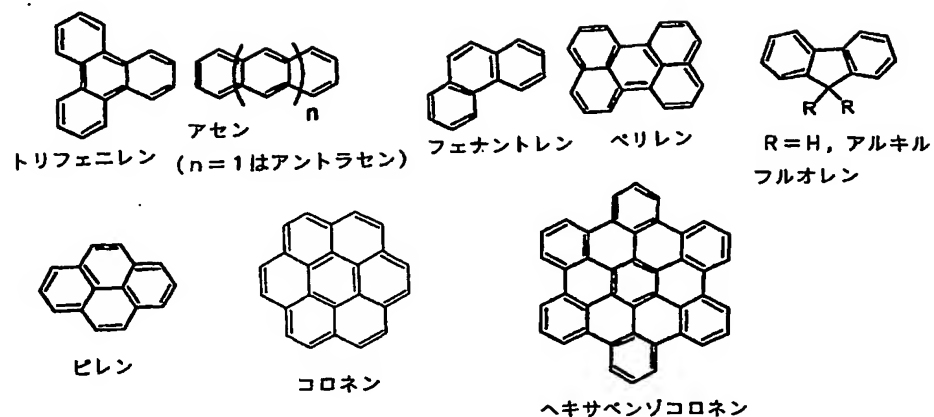
本発明の芳香族系化合物由来の他の例について測定された蛍光スペクトルを示す。

【図 8】

本発明化合物の比較用化合物について測定された蛍光スペクトルを示す。

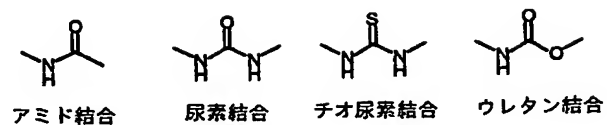
【書類名】 図面

【図 1】

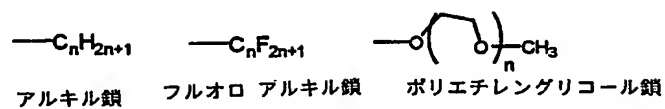


【図 2】

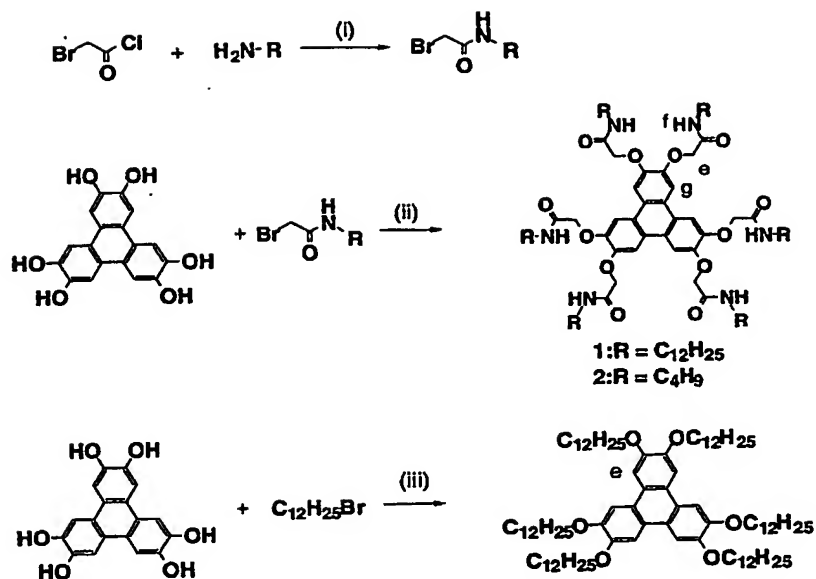
水素結合性部位



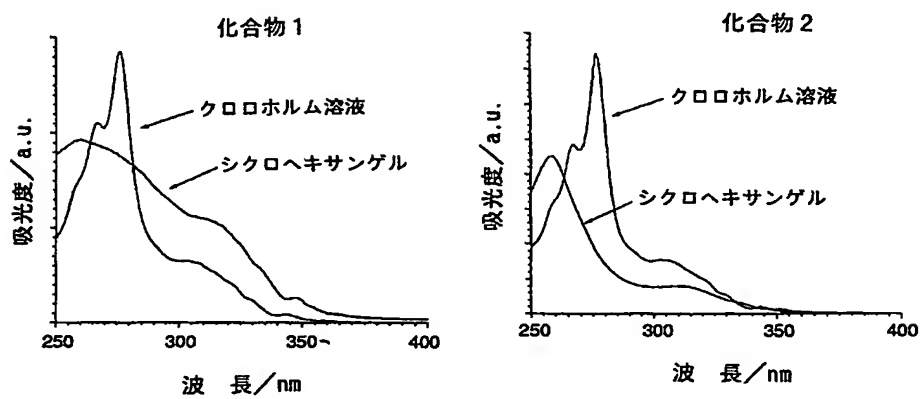
鎖式官能基



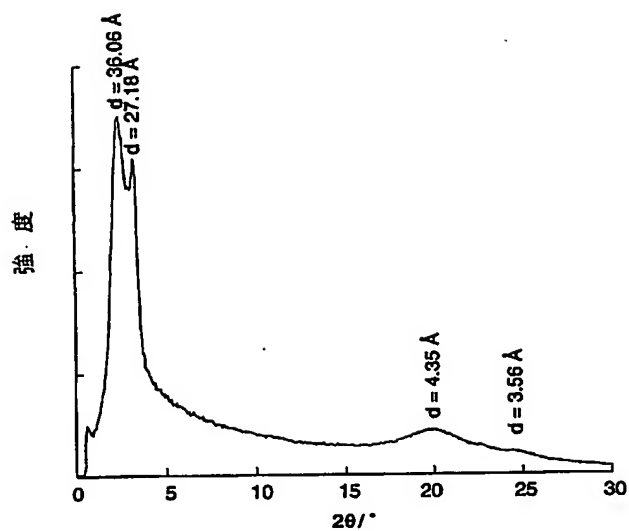
【図 3】



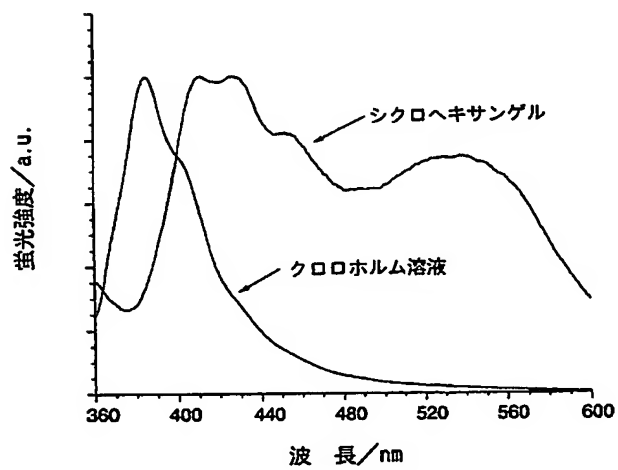
【図 4】



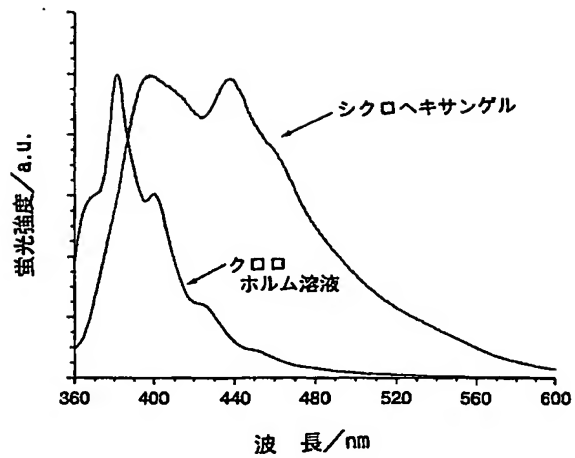
【図 5】



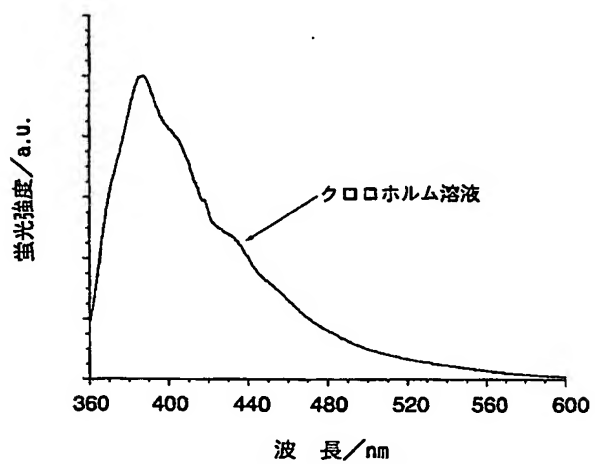
【図 6】



【図 7】



【図 8】



【書類名】 要約書

【要約】

【課題】 電荷輸送材料や光導電材料などとして好適な新規な芳香族系化合物を提供する。

【解決手段】 下記の一般式 (I) で表わされる芳香族系化合物。式 (I) 中、A は縮合型芳香族炭化水素 (例えばトリフェニレン) の残基を表わし、X は水素結合性部位 (例えば、アミド結合を含む原子団) を表わし、Y は炭素数 3 ~ 18 (好ましくは 10 ~ 18) の鎖式官能基 (例えば、アルキル基) を表わし、n は 2 ~ 10 の整数を表わす。この芳香族系化合物は、芳香環が重なり合った分子配向の分子集合体を形成する。

【化 1】



【選択図】 なし

認定・付加情報

特許出願の番号	特願 2 0 0 2 - 3 6 0 3 6 9
受付番号	5 0 2 0 1 8 8 1 4 6 1
書類名	特許願
担当官	大竹 仁美 4 1 2 8
作成日	平成 1 4 年 1 2 月 1 3 日

<認定情報・付加情報>

【提出日】	平成14年12月12日
-------	-------------

次頁無

特願 2 0 0 2 - 3 6 0 3 6 9

出 願 人 履 歴 情 報

識別番号

[ 8 0 0 0 0 0 0 3 5 ]

1. 変更年月日

2 0 0 0 年 1 0 月 1 8 日

[変更理由]

住所変更

住 所

福岡県福岡市東区箱崎 6 丁目 1 0 番 1 号

氏 名

株式会社産学連携機構九州



**This Page is Inserted by IFW Indexing and Scanning  
Operations and is not part of the Official Record**

## **BEST AVAILABLE IMAGES**

Defective images within this document are accurate representations of the original documents submitted by the applicant.

Defects in the images include but are not limited to the items checked:

- ☒ **BLACK BORDERS**
- ☒ **IMAGE CUT OFF AT TOP, BOTTOM OR SIDES**
- ☒ **FADED TEXT OR DRAWING**
- ☐ **BLURRED OR ILLEGIBLE TEXT OR DRAWING**
- ☐ **SKEWED/SLANTED IMAGES**
- ☒ **COLOR OR BLACK AND WHITE PHOTOGRAPHS**
- ☐ **GRAY SCALE DOCUMENTS**
- ☐ **LINES OR MARKS ON ORIGINAL DOCUMENT**
- ☐ **REFERENCE(S) OR EXHIBIT(S) SUBMITTED ARE POOR QUALITY**
- ☐ **OTHER:** \_\_\_\_\_

**IMAGES ARE BEST AVAILABLE COPY.**

**As rescanning these documents will not correct the image problems checked, please do not report these problems to the IFW Image Problem Mailbox.**